



TITLE:

ダストアグリゲイト衝突の数値シミュレーション(粉体物理の現状と展望,2006年度後期基礎物理学研究所研究会)

AUTHOR(S):

和田, 浩二; 田中, 秀和; 陶山, 徹; 木村, 宏; 山本, 哲生

---

CITATION:

和田, 浩二 ...[et al]. ダストアグリゲイト衝突の数値シミュレーション(粉体物理の現状と展望,2006年度後期基礎物理学研究所研究会). 物性研究 2007, 88(2): 180-187

ISSUE DATE:

2007-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110818>

RIGHT:

## ダストアグリゲイト衝突の数値シミュレーション

北海道大学低温科学研究所 和田浩二<sup>1</sup>, 田中秀和, 陶山徹, 木村宏, 山本哲生

惑星形成はダスト ( $\mu\text{m}$  以下のサイズの粒子が多数付着しアグリゲイトになっている) 同士が衝突合体成長していくことから始まるが、その詳細は不明な点が多い。本研究では、ダスト同士の衝突によってその構造がどう変化するかを明らかにすることを目的に、アグリゲイト衝突の数値シミュレーションを行った。先行研究と比較するために、特に2次元のシミュレーションに焦点を絞り、アグリゲイトの構造変化(圧縮過程、破壊過程)をより定量的に評価することで、その衝突エネルギー依存性や構成粒子数依存性を明らかにした。

### 1 背景

近年確立されつつある惑星形成論によれば、原始惑星系円盤内において、 $\mu\text{m}$  以下のサイズのダスト粒子が付着成長し(ダストアグリゲイトの形成)、やがて数  $\text{km}$  サイズの微惑星が形成され、さらに微惑星が集積することで惑星が形成される、というシナリオが有力である。しかしながら、ダストから微惑星が形成される過程が明らかになっておらず、惑星形成論の大きな問題点となっている。ダストが微惑星にまで成長する過程では、その密度や断面積といったダストの構造が、円盤中でのガス抵抗や衝突速度などに影響し、ダストが付着成長できるかどうかを左右する(例えば[1])。したがって、微惑星形成を論じるうえで、ダストアグリゲイト同士が衝突した結果どういう構造となるのか、その構造進化過程を明らかにすることが重要となる。

ダスト成長の最初の段階では、衝突の相対速度が小さい( $< 1 \text{ cm/s}$ ) ために同じサイズのダスト同士がその構造を保ったまま変形せずに付着成長していく (Ballistic Cluster-Cluster Aggregation: BCCA)。その結果、非常に空隙率が大きくフラクタル次元がおよそ2の構造、いわゆる BCC アグリゲイトが形成される。そのような BCC アグリゲイトは成長に伴って運動エネルギーが増すため、やがては変形・圧縮され密な構造になり、衝突速度によっては破壊されてしまうだろう。微惑星形成を論じるためにはこのようなダスト成長過程において、いつ、どのように圧縮(あるいは破壊)され構造が変化していくのか、を定量的に明らかにする必要がある。

Dominik and Tielens[2] は、アグリゲイト同士の衝突の数値シミュレーションを行った。そのシミュレーションは粒子間相互作用を考慮しながらアグリゲイトを構成する粒子一つ一つの運動を計算するものであり、アグリゲイトの圧縮・破壊過程に関して有用な規準(“DT レシピ”)を見出している。DT レシピは衝突結果の衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  依存性を示すもので、例えば

---

<sup>1</sup>E-mail: wada@neko.lowtem.hokudai.ac.jp

- $E_{\text{imp}} \approx n_k E_{\text{roll}}$  の場合、アグリゲイトは最大に圧縮される。
- $E_{\text{imp}} \geq 10n_k E_{\text{break}}$  の場合、アグリゲイトはカタストロフィックに破壊<sup>2</sup>される。

ここで、 $n_k$  は衝突前のアグリゲイト中の粒子同士の全接触点数、 $E_{\text{roll}}$  は一つの接触点において1粒子を90° 転がすのに必要なエネルギー、 $E_{\text{break}}$  は平衡状態で接触している粒子同士を完全に引き離すのに必要なエネルギーである。Dominik and Tielens[2, 3] によれば、 $E_{\text{roll}}$  は

$$E_{\text{roll}} = 12\pi^2 \gamma R \xi_{\text{crit}} \quad (1)$$

で与えられる。ここで $\gamma$ は表面エネルギー、 $R$ は接触2粒子の換算半径、 $\xi_{\text{crit}}$ は転がりの弾性限界変位（後述）である。また、 $E_{\text{break}}$ は、表面エネルギーをもった弾性球間に働く力をモデル化したJKR理論[5, 6, 7]から、

$$E_{\text{break}} = \frac{4}{5} \left( \frac{1}{9} + 6^{1/3} \right) F_c \delta_c \approx 1.54 F_c \delta_c \quad (2)$$

で与えられる。ここで $F_c = 3\pi\gamma R$ は接触粒子を引き離すのに必要な最大の力、 $\delta_c$ は接触粒子間圧縮(伸長)変位の限界距離である。

DT レシピは簡便で有用であるが、Dominik and Tielens のシミュレーションは限られた条件（2次元正面衝突、アグリゲイトの構成粒子数はたった40個、アグリゲイトの初期構造は1種類のみ）で行われたものである。実際のダストは3次元であり、構成粒子数も億を超える。したがって、ダストの構造進化過程を明らかにするためには、多数の粒子からなる3次元アグリゲイト同士の衝突の数値シミュレーションを行い、その構造変化の粒子数依存性や物性依存性などを明らかにする必要がある。そこで、我々は多数の粒子・様々な初期構造からなるBCCアグリゲイトを用意してこれらの衝突数値シミュレーションを行った。本研究では、Dominik and Tielens[2] との比較のために、2次元のBCCアグリゲイトの正面衝突のシミュレーションに絞って議論する。

## 2 粒子間相互作用モデル

我々のシミュレーションにおいては、半径 $r_1 = 0.1\mu\text{m}$ の石英または氷粒子からなるアグリゲイト同士の衝突を考える。シミュレーション手法はDominik and Tielens[2]と同様に、個々の粒子の運動を逐一計算していくものである。用いた粒子間相互作用モデルについて詳しくはWada et al.[8]を参照してもらうとして、ここではその概要を述べる。粒子は表面エネルギーの作用する弾性球とし、接触粒子間の法線方向相互作用はJKR理論[5, 6]にもとづいて2粒子間の圧縮変位 $\delta = 2r_1 - |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ の関数として与える（ $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ は各々粒子1,2の中心の位置ベクトル）。また、接線方向に作用する抵抗力（またはトルク）はスライド、転がり、振れの各運動に対して図1に示される変位 $\zeta, \xi, \phi$ の関数として与える。これらは弾性論[6]およびDominik and Tielens[3, 4]によ

<sup>2</sup>ここでは衝突の結果生じた最大クラスターの構成粒子数が全粒子数の半分以上となった場合をカタストロフィック破壊と定義する。

て定式化されている。我々はこれらの相互作用をポテンシャルを用いて記述した<sup>3</sup>。

$$U_{\text{total}} = U_n(\delta) + U_{\text{slide}}(\zeta) + U_{\text{roll}}(\xi) + U_{\text{twist}}(\phi). \quad (3)$$

このポテンシャルを粒子の位置や回転変位で微分することで、エネルギー（および運動量・角運動量）を保存する作用力やトルクが得られる。

エネルギー散逸は、粒子の接触時と分離時に JKR 理論によるポテンシャルの段差に応じて生じる [7]。また、接線方向の各変位には弾性限界変位  $\zeta_{\text{crit}}$ ,  $\xi_{\text{crit}}$ ,  $\phi_{\text{crit}}$  が想定され、変位が限界変位を超えると非弾性運動となってエネルギーが散逸する。スライドの限界変位  $\zeta_{\text{crit}}$  は Dominik and Tielens [2, 4] によって与えられ、例えば半径  $0.1\mu\text{m}$  の石英粒子では  $\zeta_{\text{crit}} \approx 1.5\text{\AA}$  となる。転がりの限界変位  $\xi_{\text{crit}}$  については、Dominik and Tielens [3] では理論的に  $\xi_{\text{crit}} = 2\text{\AA}$  で与えられているが、Heim らの実験 [9] によると半径  $0.9\mu\text{m}$  の石英粒子に対しては  $\xi_{\text{crit}} \approx 30\text{\AA}$  と測定されており、よく分かっていない。したがって、我々のシミュレーションでは  $\xi_{\text{crit}}$  はパラメーターとして扱う。振れの限界変位は  $\phi_{\text{crit}}$  は Dominik and Tielens [2, 4] によって与えられ、 $\phi_{\text{crit}} \approx 1.1^\circ$  である。

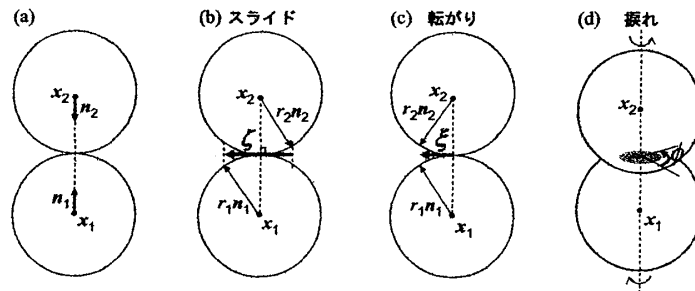


図 1: 接触粒子 1 と 2 (位置ベクトル  $x_1, x_2$ ) の (a) 接触時、(b) スライド運動、(c) 転がり運動、(d) 振れ運動、の模式図。スライドと転がり運動 (変位は各々  $\zeta, \xi$ ) は、最初の接触点方向を示す単位ベクトル  $n_1, n_2$  の動きによって表現される。振れ運動の変位角は  $\phi$ 。

### 3 初期条件とパラメーター

シミュレーションの初期構造として、同一径 (半径  $r_1 = 0.1\mu\text{m}$ ) の粒子からなる 2 次元の BCC アグリゲイトを用意する。初期構造による違いを統計的に処理すべく、アグリゲイト作成時に接触方向をランダムに変えることで BCCA ではあるが異なる初期構造を 3 種類用意した。また、アグリゲイトの構成粒子数を 8 個から 2048 個まで変えたものを用意し、結果に対する粒子数依存性を見ることとした。128 個の粒子からなる 3 種類の初期アグリゲイト構造を図 2 に示す。

粒子の物性としては石英 (表面エネルギー  $\gamma = 25 \text{ mJ/m}^2$ , ヤング率  $E = 54 \text{ GPa}$ , ポアソン比  $\nu = 0.17$ , 密度  $\rho = 2.6 \text{ g/cm}^3$ ) または氷 ( $\gamma = 100 \text{ mJ/m}^2$ ,  $E = 7 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.25$ ,  $\rho = 1.0 \text{ g/cm}^3$ ) を仮定した。転がりの限界変位  $\xi_{\text{crit}}$  はパラメーターとして、 $\xi_{\text{crit}} = 2\text{\AA}$  または  $30\text{\AA}$  とした。ただし、結果は主に  $\xi_{\text{crit}} = 2\text{\AA}$  に対して得られたものを示す。

<sup>3</sup>現実には各運動の自由度に対して独立したポテンシャルでは書き下せないが、ここではエネルギー保存を重視する立場からとりあえず独立したポテンシャルを仮定した。

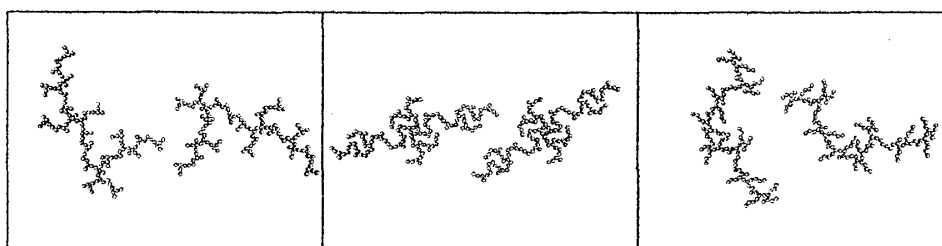


図 2: 2次元 BCC アグリゲイトの衝突前の初期構造 (3 種類) の例。ここでは 128 個の粒子からなるアグリゲイトを示した。衝突方向は図の水平方向 (正面衝突)。

アグリゲイト同士の衝突は正面衝突とし、衝突速度は石英アグリゲイトの場合には  $0.038\text{m/s}$  から  $5.7\text{m/s}$ 、氷アグリゲイトの場合には  $0.38\text{m/s}$  から  $57\text{m/s}$  まで変えてシミュレーションを行った。

## 4 シミュレーション結果と議論

### 4.1 シミュレーション例

アグリゲイト同士の衝突の結果生じる典型的な構造を図 3 に示す。衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  の違いによって衝突の結果は大きく異なる。衝突速度が十分小さければアグリゲイトは変形せずに接触・付着する。衝突エネルギーが大きくなるにつれ、幾つかの粒子間接触点での転がり運動によってアグリゲイトの変形が始まり (図 3a)、やがて最も圧縮された構造になる (図 3b)。また、形成されたクラスターから幾つかの粒子が分離し始め (図 3c)、かなり大きな衝突エネルギーの場合には大規模に破壊されてしまう (図 3d)。

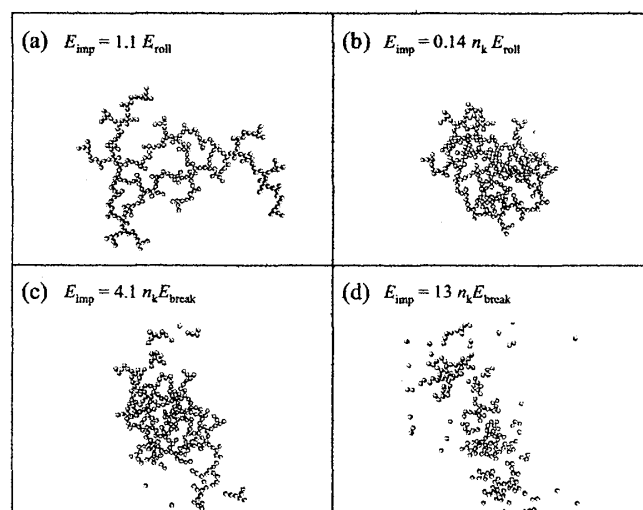


図 3: 128 個の石英粒子からなるアグリゲイト同士の衝突結果の例。衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  が大きくなるに従って、(a) 変形開始、(b) 最大圧縮、(c) 破壊開始、(d) カタストロフィック破壊、となる。

## 4.2 圧縮過程：回転半径の変化

アグリゲイトのスケールを表す典型的な量として回転半径 (gyration radius) について注目し、衝突エネルギーに対してアグリゲイトの圧縮度合いがどう変化するかを示す。アグリゲイトの回転半径  $r_g$  は次のように定義される：

$$r_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_i (x_i - x_M)^2} \quad (4)$$

ここで、 $N$  はアグリゲイトの構成粒子数、 $x_i$  は粒子  $i$  の中心座標、 $x_M$  はアグリゲイトの重心座標である。

回転半径  $r_g$  は衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  が大きくなるにつれて減少していく (図 4)。これはアグリゲイトの圧縮過程を示すものである。回転半径は物性の違いにほとんど依らず、衝突エネルギーが  $E_{\text{imp}} \sim 0.1 E_{\text{roll}}$  のときから次第に減少していき、 $E_{\text{imp}} \sim n_k E_{\text{roll}}$  で一定の値に到達する。このことは  $E_{\text{imp}} \sim n_k E_{\text{roll}}$  で圧縮が最大になることを意味しており、先に述べた DT レシピの最大圧縮規準と調和的な結果となった。

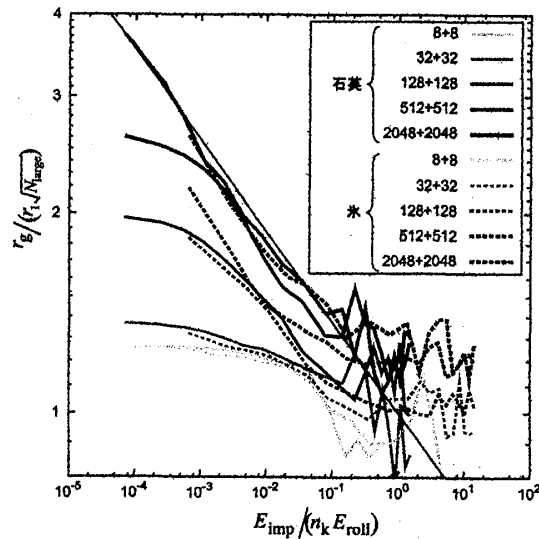


図 4: アグリゲイトの回転半径  $r_g$  ( $r_1 \sqrt{N_{\text{large}}}$  で規格化) を衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  ( $n_k E_{\text{roll}}$  で規格化) の関数としてプロットしたもの。初期構造の異なる 3 種類の結果を平均して表示している。実線が石英、破線が氷の結果で濃淡は構成粒子数の違いを示す。細線はモデルから得られた関係式:  $r_g / (r_1 \sqrt{N_{\text{large}}}) = [E_{\text{imp}} / (n_k E_{\text{roll}})]^{-0.137}$ 。

また、アグリゲイトの粒子数がある程度以上になると (全粒子数  $N_{\text{total}} > 256$ )、図 4 における回転半径の変化の傾き (冪) が一定となる傾向が見られる。この一定の傾きは次のようなモデルで考えることができる。簡単に、BCC アグリゲイトは  $E_{\text{imp}} \sim E_{\text{roll}}$  で明瞭に変形を開始し、 $E_{\text{imp}} \sim n_k E_{\text{roll}} \simeq N E_{\text{roll}}$  で最大圧縮に到達するとしよう。BCC アグリゲイトの回転半径  $r_{g,\text{BCCA}}$  はフラクタル次元  $d_f$  を用いて、 $r_{g,\text{BCCA}} \sim r_1 N^{1/d_f}$  と表せる (例えば [10])。一方コンパクトなアグリゲイトの回転半径は 2 次元の場合  $r_{g,\text{comp}} \sim r_1 N^{1/2}$  と表せる。このとき、圧縮過程における回転半径の変化の傾きは

$$\frac{\Delta \log r_g}{\Delta \log E_{\text{imp}}} = \frac{\log r_{g,\text{comp}} - \log r_{g,\text{BCCA}}}{\log (N E_{\text{roll}}) - \log E_{\text{roll}}} \simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{d_f} \quad (5)$$

となり、粒子数に依らず一定となる。実際我々が数値的に作成した2次元BCCアグリゲイトは  $d_f = 1.57$  で、上述の傾きは  $-0.137$  となる。この傾きもった線は図4に見られるように結果に良く合う。このことは圧縮過程のスケーリング則が得られたことを意味する。また、転がりのエネルギー  $E_{\text{roll}}$  でスケーリングされることは、接触粒子間の転がりによって変形・圧縮されることを示している。

### 4.3 圧縮過程：接触点数の変化

圧縮過程を示すもう一つの指標として、アグリゲイト中の一粒子あたりの接触点数  $n_{\text{con}}$  の変化を衝突エネルギーの関数として示したものが図5である。アグリゲイトが圧縮されるにつれ接触点数  $n_{\text{con}}$  は増加していく。粒子数がある程度大きければ、 $n_{\text{con}}$  の変化は物性や粒子数に依らず同じ傾向を示しており、スケーリング則の存在を示唆している。ここでは、結果にフィットする経験式として  $n_{\text{con}} = 1 + [E_{\text{imp}} / (n_k E_{\text{roll}})]^{3/4}$  が得られた。

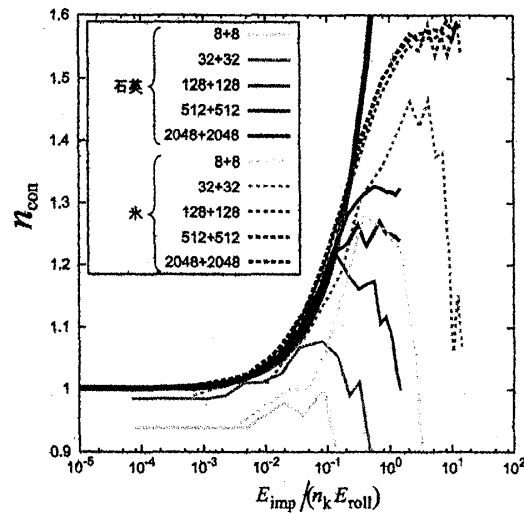


図5: 最大クラスターにおける1粒子当たりの接触点数  $n_{\text{con}}$  を衝突エネルギー  $E_{\text{imp}} / (n_k E_{\text{roll}})$  の関数としてプロットしたもの。薄い太線は得られた経験式:  $n_{\text{con}} = 1 + [E_{\text{imp}} / (n_k E_{\text{roll}})]^{3/4}$ 。

一方、図5において接触点数の最大値、即ち最大圧縮度は物性値に依存しており、氷のほうが石英に比べ最大圧縮度が大きい。この最大圧縮度の違いは、転がりと引き剥がしのエネルギー比

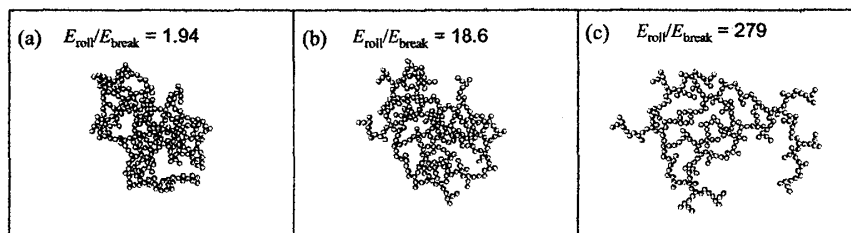


図6:  $E_{\text{roll}}/E_{\text{break}}$  の値によるアグリゲイトの最大圧縮時の構造の違い。ここに示したのは128個の粒子からなるアグリゲイト同士の衝突によるもので、パラメーターはそれぞれ (a) 氷,  $\xi_{\text{crit}} = 2\text{\AA}$ 、(b) 石英,  $\xi_{\text{crit}} = 2\text{\AA}$ 、(c) 石英,  $\xi_{\text{crit}} = 30\text{\AA}$ 。

$E_{\text{roll}}/E_{\text{break}}$  に依っていると考えられる。実際、最大圧縮時の構造を見てみると (図 6)、 $E_{\text{roll}}/E_{\text{break}}$  が大きいほどアグリゲイトはあまり圧縮されていない。 $E_{\text{roll}}/E_{\text{break}}$  は最大圧縮の困難さを示す指標となっている。

#### 4.4 破壊過程：最大クラスター構成粒子数

アグリゲイトの破壊の程度は、衝突の結果生じた最大クラスターの構成粒子数  $N_{\text{large}}$  の全粒子数  $N_{\text{total}}$  に対する割合で評価できる。 $N_{\text{large}}/N_{\text{total}}$  を衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  に対してプロットしたものが図 7a である。おおよそ  $E_{\text{imp}}$  が  $n_k E_{\text{break}}$  の数倍以上でアグリゲイトは壊れ始め、 $E_{\text{imp}} \approx 10 n_k E_{\text{break}}$  で  $N_{\text{large}}/N_{\text{total}} = 0.5$ 、すなわちカタストロフィック破壊となる。この結果はやはり先に述べた DT レシピの破壊規準と調和的である。ただし、 $N_{\text{total}}$  が大きくなるにつれてアグリゲイトは破壊されにくくなる傾向が見られる。図 7a に示された  $N_{\text{total}} = 4096$  の場合にはその傾向は当てはまらないように見えるが、初期構造の違いによっては他の場合に比べ最も破壊されにくくなるものがある (図 7b)。しかし、 $N_{\text{total}} = 4096$  の場合には、容易に破壊されるものも見られ、破壊に対する耐性の幅が広い。これは実際のシミュレーションの様子を見れば分かるが、衝突方向の衝突断面積に依っている。衝突断面積が小さければエネルギーが効率よく散逸され破壊しにくくなり、断面積が大きければアグリゲイトの様々な場所において破壊が生じ幾つかのクラスターに容易に分裂してしまう。したがって粒子数が多くなるとその衝突方向が重要になることが示唆される。

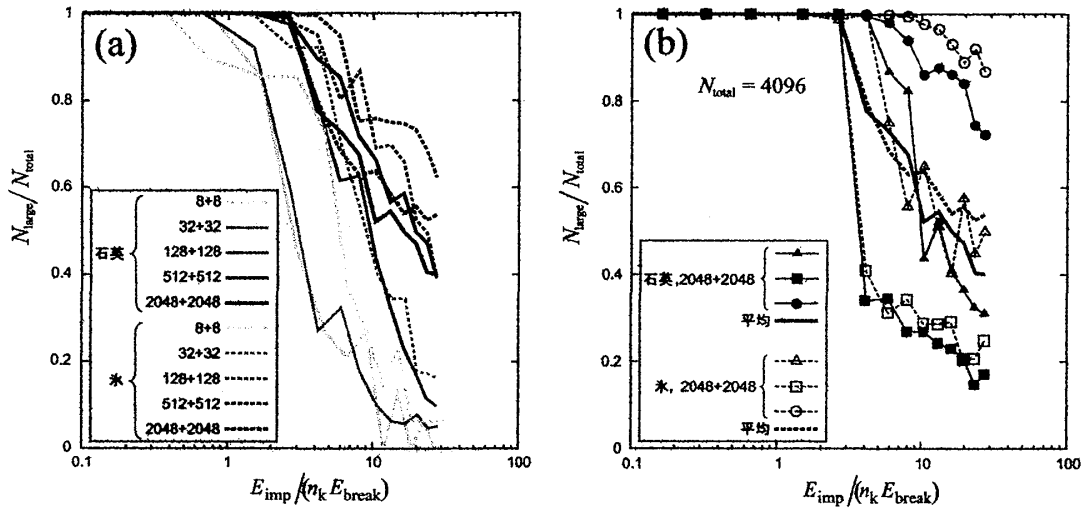


図 7: (a) 最大クラスターの構成粒子数と全粒子数の比  $N_{\text{large}}/N_{\text{total}}$  を衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  ( $n_k E_{\text{break}}$  で規格化) の関数としてプロットしたもの。(b)  $N_{\text{total}} = 4096$  の場合のみを異なる初期構造に対してプロットしたもの。

## 5 まとめ

本研究では、ダストアグリゲイトが衝突によって圧縮・破壊される過程を理解するために、2次元の BCC アグリゲイト同士の衝突シミュレーションを多数の粒子・様々な初期構造に対して行っ



た。その結果、圧縮・破壊の規準はおおよそ Dominik and Tielens[2] の DT レシピと調和的であった。さらに圧縮過程はアグリゲイトの回転半径  $r_g$  および接触点数  $n_{\text{con}}$  によって評価でき、衝突エネルギー  $E_{\text{imp}}$  および転がりエネルギー  $E_{\text{roll}}$  を用いたスケーリング則が得られた：

$$r_g = r_1 \sqrt{N_{\text{large}}} \left( \frac{E_{\text{imp}}}{n_k E_{\text{roll}}} \right)^{-0.137} \quad (E_{\text{roll}} \lesssim E_{\text{imp}} \lesssim n_k E_{\text{roll}}) \quad (6)$$

$$n_{\text{con}} = 1 + \left( \frac{E_{\text{imp}}}{n_k E_{\text{roll}}} \right)^{3/4} \quad (E_{\text{imp}} \lesssim n_k E_{\text{break}}) \quad (7)$$

また最大圧縮度は、 $E_{\text{roll}}/E_{\text{break}}$  に依存することが分かり、氷のほうが石英より圧縮されることが説明される。破壊過程に関しては、やはり DT レシピと調和的な結果が得られたが、粒子数が多くなると破壊されにくいという傾向も見られた。このことは、大きなダストはより効率的に成長できることを示唆するが、粒子数が多くなるとその衝突方向が重要になることに注意が必要である。

本研究は2次元正面衝突のシミュレーションを議論した。今後は3次元アグリゲイトの衝突について調べる必要がある。幾つかの予備的なシミュレーションでは、オフセット衝突の場合アグリゲイトは長く伸びる傾向がみられ、必ずしもコンパクトに圧縮されないという結果が得られつつある。オフセット衝突も含めた3次元シミュレーションによってダストの構造進化過程が明らかになると期待される。

## 参考文献

- [1] Weidenschilling, S. J., & Cuzzi, J. N. 1993, in *Protostars and Planets III*, ed. E. H. Levy & J. I. Lunine (Tucson: University of Arizona Press), 1031
- [2] Dominik, C., & Tielens, A. G. G. M. 1997, *Astrophys. J.*, 480, 647
- [3] Dominik, C., & Tielens, A. G. G. M. 1995, *Phil. Mag. A*, 72, 783
- [4] Dominik, C., & Tielens, A. G. G. M. 1996, *Phil. Mag. A*, 73, 1279
- [5] Johnson, K. L., Kendall, K., & Roberts, A. D. 1971, *Proc. R. Soc. London A*, 324, 301
- [6] Johnson, K. L. 1987, *Contact Mechanics* (Cambridge: Cambridge Univ. Press)
- [7] Chokshi, A., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. 1993, *Astrophys. J.*, 407, 806
- [8] Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H., & Yamamoto, T. 2007, submitted to *Astrophys. J.*
- [9] Heim, L.-O., Blum, J., Preuss, M., & Butt, H.-J. 1999, *Phys. Rev. Lett.*, 83, 3328
- [10] Mukai, T., Ishimoto, H., Kozasa, T., Blum, J., & Greenberg, J. M. 1992, *Astron. Astrophys.*, 262, 315